Mathematicaによる散乱問題の研究(数式処理と数学研究への応用)

AUTHOR(S):

坂本, 薫

数理解析研究所講究録
第 753 巻 1991 年 129-134

Mathematicaによる散乱問題の研究

岡山理科大学　理学部
応用数学科　坂本薫（Kaoru Sakamoto）

1. 序論

コンピュータと周辺機器の発展につれて，物理の問題が数式処理システムで解かれるようになった。又，パーソナル コンピュータでもそのようなシステムの使用が可能になった。そこで，物理の散乱問題を扱っているテキストに記載されている問題の一例を自動的に計算するプログラムを Mathematica で作成するための研究が行われた。プログラムは出来るだけ一般的に作成し，TeX 等に出力して数式が清書できるように考慮された。

2. Feynman 図形の自動生成

量子電気力学での Feynman 図形の自動生成は Common Lisp で作成されたがここでは，議論しない。【1】,【2】

3. Feynman 規則【3】

実際の計算はすべて運動量表示で行われる。
[規則 1] 各内線 ℓ に 4 次元運動量 p_ℓ の向きを指定する。
[規則 2] 各内線 ℓ に 運動量表示の Feynman 伝播関数を用意する。

スカラー粒子: $\frac{-i}{(2\pi)^4}\cdot\frac{1}{\mu^2-p_l^2-i\epsilon}$

スピノル粒子: $\frac{-i}{(2\pi)^4}\cdot\frac{m+\gamma p_l}{m^2-p_l^2-i\epsilon}$

光子: $\frac{-i}{(2\pi)^4}\left[\frac{-g_{\mu\nu}}{-p_l^2-i\epsilon}-(1-\alpha)\frac{(p_l)_\nu(p_l)_\mu}{(-p_l^2-i\epsilon)^2}\right]$

ここで，γp_ℓ は $\gamma^\mu(p_\ell)_\mu$ の略である。中性ベクトル粒子については上式の第一項の分母と第二項の分母の因子を $m^2-p_\ell^2-i\epsilon$ に置き換えて$\alpha=0$ とすればよい。なお，計算が進行して分母のゼロ点の上を通る積分をする必要がなくなった時点で $\epsilon\to+0$ の極限を取る。
[規則 3] 各外線に運動量表示の波動関数を用意する。

スカラー粒子: $\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{p}}}},(\omega_{\vec{p}}\equiv\sqrt{\mu^2+\vec{p}^2})$

スピノル粒子: $\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{m}{E_{\vec{p}}}}w_s(p),(E_{\vec{p}}\equiv\sqrt{m^2+\vec{p}^2})$

（ただし，w_s は初期状態のときは u_s 又は $\bar{v}_s$，終状態のときは $\bar{u}_s$ 又は v_s を表す。）

光子: $\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2|\vec{p}|}}\epsilon_\mu^{(\lambda)}$

（ただし $\epsilon^{(\lambda)}$ は横波光の偏向方向($\lambda=1,2$)を表す。$(\epsilon^{(\lambda)})^2=-1, p^\mu\epsilon_\mu^{(\lambda)}=0$ を満足する。）
[規則 4] スピノル粒子に関係するものを内向きの外線から始めて順次矢印の向きに従って並べる。そのとき各頂点に L_I の中の対応する項に含まれているガンマ行列 $(1,\gamma_\mu,i\gamma_5\gamma^\mu,\gamma^5)$ をはさむ。ループについてもガンマ行列を順次並べ，各ループごとにトレースをとる。
[規則 5] 各頂点 a_j に対して，$(2\pi)^4g_j$ を用意する。ただし，g_j は頂点 a_j に対応する L_I の中の項の結合常数を表す。
[規則 6] 以上を全部掛け合わせて，全ての内線の 4 次元運動量p_ℓ について積分する。
[規則 7] 統計因子，対称性因子，状態符号因子，ループ符号因子を掛ける。
4 次元運動量ベクトルについてのデルタ関数は Feynman 図形を生成された後考慮される。【2】

4. 運動量，ガンマ行列の表示について【6】

4 次元運動量は番号を付けられ，p[1] のように表示される。しかし，Γ_k^{ij} のようなテンソルは *Gamma[li[k],*

$ui[i], ui[j]$ のように表示される。 テンソル成分と 4 次元運動量の成分の積の和を表す γp は, $Gamma[1]*P[1]$のように省略して表示する。 3 次元運動量 $\vec{p}[1]$ は $vec[P[1]]$ のように表示される。

5. 遷移確率の絶対値について 【3】,【4】,【5】

遷移確率の絶対値は, それとそのエルミット共役の積を求めねばなばならない。遷移確率を演算子の積 $A_1A_2 \ldots A_{n-1}\ A_n$ とすれば, そのエルミット共役は $A_n^\dagger A_{n-1}^\dagger \ldots A_2^\dagger A_1^\dagger$ である。 演算子はエルミット共役をとるとその演算子の複素共役をとる事ではなくて演算子が変わる。 $u^\dagger = \bar{u}$ 演算子の積のエルミット共役を取る関数を AJoint-product とすると, それは, 積をリストに直し, 各々の演算子のエルミット共役を取り, もとの逆順の要素のリストを作り, 積に直せばよい。 それはピュアの関数 #[[i]]&[x] を使って次のように定義される。

```
AjoinProduct[NonCommutativemultiply[x_]]:=
Block[{i=1,ans={},imax=Length[x],y},
While[i <= imax,(
ans=Join[y=TransConjugate1[#[[i]]&[x]],ans];i=i+1];
Return[ans]]
```

遷移確率の絶対値は演算子の積をリストにする関数 ProductList と関数 AjointProduct を用いて作られる。

```
ProductList[NonCommutativeMultiply[x_]]:=
Block[{i=1,imax=Length[x],ans={}, },
While[i<= imax,(
ans=Append[ans,#[[i]]&[x]];i=i+1)];Return[ans]]
AbsProduct[x_]:=
Apply[NonCommutativeMultiply,Append[ProductList[x],AjointProduct[x]]]
```

6. 交換関係の使用について 【3】,【5】

6.1 隣り合った演算子に同じ交換関係が存在するとき

量子力学では一般に演算子を交換するとき, 交換される演算子の間の交換関係を考慮しなければならない。先ず, 演算子の積をリストにして, 隣あったリストの要素の演算子を交換するとき交換関を考慮に入れる。リストの要素の演算子を交換するとき, 一定の交換関係 $a_i a_{i+1} = a_{i+1} a_i + p$ とするとき, 前から n 番目の演算子を次々と交換して最後に置くとき, それを求める関数は次のように定義される。

```
CommutateOpes[x_,n_,p_]:=
Block[{y=ProductList[x],y1,y2,n1=n+1,ans=0,imax},
imax=Length[y];
While[n1 <= imax,(y1=Drop[y,{n1-1,n1}];
y2=Join[Take[y,{n1,n1}],Take[y,n1-1.n1-1}]];
If[n1 == 2 & & n1== imax,y=y2,If[n1==2,y=Join[y2,Take[y,{n1+1,imax}]]],
If[n1 == imax,y=Join[Take[y,{1,n1-2}],y2],
y=Join[Take[y,{1,n1-2}],y2,Take[y,{n1+1,imax}]]]]]];ans=ans+
p*Apply[NonCommutativeMultiply,y2];
;n1=n1+1)];ans=Apply[NonCommutativeMultiply,y]+ans;
Return[ans]]
```

6.2 隣り合った演算子に異なった交換関係や反交換関係が存在するとき

隣り合った演算子を交換するとき, 一般に, それらの演算子の間に異なった交換関係, 反交換関係を考慮しなければならない。この交換関係を演算子の種類ごとに定める。 これを, Mathematica では, 次のように表現された。 CommutateRelation[A[m],B[n]]:= B[n]** A[m]+p あるいは -B[n]** A[m]+q 以上の事を考慮して,5.1 と同様の関数が作成された。

演算子の積 x の n と n+1 番目の演算子の交換によって作られる式を返す関数 CommutateOperators は以下のように定義される。

```
CommutateOperators[x_,n_]:=
Block[{y=ProductList[x],y1,y2={},n1=n+1,relation,imax,ans,ans0,imax=Length[x]} ,
y1=Join[Take[y,{n1,n1},Take[y,{n1-1,n1-1}]];
relation=CommutateRelation[y,y1];
If[imax==2,Return[relation]];
```

```
If[n1==2 ,(ans=ProductList[GetPairOperators[relation]],
(ans=Join[Take[y,{1,n-1}],ProductList[
GetPairOperators[relation]]]))];
If[n1==imax,Return[ans=Apply[NonCommutativeMultiply.ans]],
(ans=Join[ans,Take[y,{n1+1,imax}]];
ans0=Apply[NonCommutativeMultiply,ans];
+GetSurplus[relation]*
If[Length[y2=Opes2[x,n1]]==1,y2,
Apply[NonCommutativeMultiply,y2]]))];
Return[ans0]]
```

```
Opes2[y_,n_]
Block[{ imax=Length[y],x=ProductList[y],ans={}},
If[n==2,ans=Take[x,{ n +1,imax }],
ans=Join[Take[x,{ 1,n-1 }],Take[x,{ n+1,imax } ]]];
If[Length[ans]==1,Return[First[ans]],
Return[Apply[NonCommutativeMultiply
,ans]]]]
```

```
ProductList[x_]:=
If[SameQ[Head[x],Plus],Pro[x],List[x]]
```

```
Pro[x_]:=
Block[ { i=1,imax=Length[x],ans= {}},
While[i< + imax,(ans=Append[ans, # [[i] & [x]];i=i+1)];Return[ans]]
```

Next はリストの 2 番目の要素を返す。

```
Next[x_]:=First[Rest[x]]
```

6.3 演算子の線形結合と演算子の交換関係

演算子同士の交換関係から，演算子の線形結合の交換関係は導出される。ここで，よく現れる，演算子の線形結合と演算子の交換関係を導出する。演算子の線形結合を$P = a_1A_1 + a_2A_2 + \cdots + a_nA_n$ とする。ここで，$a_1, a_2, \cdots, a_n$ は数式あるいは数を表している。その線形結合 P と Q=b_1B_1 の交換関係を求めよう。$(a_1A_1 + a_2A_2 \cdots + a_nA_n)b_1B_1 = b_1a_1 \times Relation[A_1, B_1] + b_2a_2 \times Relation[A_2, B_2] + \cdots + a_nb_n \times Relation[A_n, B_n]$ ここで，$Relation[A_i, B_1] = \pm B_1A_i + r_i$ が成り立ち，$\pm$ は交換関係あるいは反交換関係がある事を示す。

6.4 演算子の線形結合と間の交換関係

二つの演算子を $P = a_1A_1 + a_2A_2 + \cdots + a_nA_n, Q = b_1B_1 + b_2B_2 + \cdots + b_nB_n$ とするとき,$PQ = QP' + c'$ である時,A_i と Q の交換関係が演算子を含む部分が符号 $\pm$ を別にして i に拘らず同じであることが必要である。一般に,QP'は$\sum_{i,j} a_{i,j}B_iA_j$ と表される。

7. ガンマ行列について 【3】,【5】

7.1 ガンマ行列の表示について

ガンマ行列は,

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

とすると，4 次の正方行列を用いて，次のように作る事が出来る。

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix} \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

ここで，k=1,2,3 である。

7.2 ガンマ行列のトレース

トレース (trace) とは一般に任意の正方行列の主対角線上の行列要素の和である。 $A = (a_{ij})$を正方行列とすれば$\sum_j a_{jj}$がそのトレースであり，それを trAあるいはSpAで表す。
トレースはa, bを数$A, B, \cdots$を次のような正方行列とするとき，

$$tr(aA + bB) = aTrA + bTrb$$

$$tr(AB) = tr(BA)$$

$$tr(AB \cdots YZ) = tr(B \cdots YZA) = tr(ZAB \cdots Y)$$

S が非特異行列であれば，$tr(S^{-1}AS) = trA$ である。又，次の事が成り立つ。

$$tr(\gamma^{\mu}) = 0$$

7.3. ガンマ行列の積のトレースの漸化式【3】

γ^{μ} は$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2g^{\mu\nu}$ という反交換関係を満たさねばならない。ガンマ行列の積のトレースの計算はそれを繰り返す。$tr(\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_n}) = tr((2g^{\mu_1\mu_2} - \gamma^{\mu_2}\gamma^{\mu_1})\gamma^{\mu_3}\cdot\gamma^{\mu_n}) = 2g^{\mu_1\mu_2}tr(\gamma^{\mu_3}\cdots\gamma^{\mu_n}) - tr(\gamma^{\mu_2}\gamma^{\mu_1}\cdots\gamma^{\mu_n})$
$= 2\sum_{k=2}^{n}(-1)^k g^{\mu_1\mu_k}tr(\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_{k-1}}\gamma^{\mu_{k+1}}\cdots\gamma^{\mu_n}) + (-1)^{n-1}tr(\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_n}\gamma^{\mu_1})$

trace の性質により，$tr(\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_n})(1 - (-1)^{n-1}) = 2\sum_{k=2}^{n}(-1)^k g^{\mu_1\mu_k}tr(\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_{k-1}}\gamma^{\mu_{k+1}}\cdots\gamma^{\mu_n})$
奇数個のガンマ行列の積のトレースは 0 で，偶数個のガンマ行列の積のトレースはゼロでない。二個のガンマ行列の積のトレース$tr(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu})$ は $4\gamma^{\mu\nu}$ である。

7.4 ガンマ行列の積のトレースの計算法

ガンマ行列は，Mathematica では，*Gamma[ui[n]]* のように表現され,*ui* の引数は，それの上付きの添字をあらわす。ガンマ行列の積の順序は可換でないから，積の順序を換えないために,A ** B ** C あるいは,NonCommutativeMultiply[A,,C] のように表される。関数 ProductList によって$A**B**C$ から{A,B,C}を作る。
リストの i 番目の要素を除いて，それに除かれたリストを付加する。得られたリストの先頭は，前のリストの i 番目の要素である。これをする関数は MakeNewlist である。
MakeNewlist[x_,i_]:= Join[Take[x,{i,i}],Drop[x,{i,i}]]
$tr(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}) = 4g^{\mu\nu}$ であるので，2 個のガンマ行列の積のトレースは次のように定義される。
TraceGamma[Gamma[ui[n_]]**Gamma[ui[m_]]]:= 4 g[ui[n],ui[m]]
又，G[Gamma[ui[i_]]*Gamma[ui[j_]]]:=g[ui[i],ui[j]] と定義すると，任意のガンマ関数の積のトレースは次のような関数で定義される。
TraceGamma[Gamma[ui[_]]]:=0
関数 TraceGamma はガンマ行列だけのトレースにゼロを返す事を示しているが，奇数個のガンマ行列の積のトレースにゼロを帰納的に返す事を示す。
TraceGamma[Gamma[ui[i_]]**Gamma[ui[j_]]]:= 4 g[ui[i],ui[j]]
以上は二個のガンマ行列の積のトレースの値を示す。
G[Gamma[ui[i_]]**Gamma[ui[j_]]]:=g[ui[i],ui[j]]
以上は G の値の定義です。

```
TraceGamma[y_]:=
Block[{x,imax,z,z1,z2,ans},x=ProductList[y]
z1=First[x];z=Rest[x];imax=Length[z];
Return[Sum[(z2=MakeNewlist[z,i];
(-1)^(i+1)*G[ans=z1*First[z2]]*If[Length[Rest[z2]]==1,
TraceGamma[First[Rest[z2]]],TraceGamma[Apply[NonCommutativeMultiply,
Rest[z2]]]),{i,imax}]];]
```

以上で定義された TraceGamma は任意のガンマ行列の積のトレースを計算する。

7.5 簡単なガンマ行列の積のトレースの結果

簡単なガンマ行列の積のトレースの結果は以下の通りです。
TraceGamma[Gamma[ui[1]] は 0 を返し，

TraceGamma[ui[1]]**Gamma[ui[2]]] は 4 g[ui[1],ui[2]] を,
TraceGamma[Gamma[ui[1]]**Gamma[ui[2]]**Gamma[ui[3]]] は 0 を,
TraceGamma[Gamma[ui[1]]**Gamma[ui[2]]**Gamma[ui[3]]**Gamma[ui[4]] は,
4 g[ui[1]]]g[ui[2],ui[3]]-4 g[ui[1],ui[3]] g[ui[2],ui[4]]+4 g[ui[1],ui[2]] g[ui[3],ui[4]] を返す。

8. 演算子の簡約について 【3】,【5】

次の 2 式が成り立つ。

$$(m-\gamma p)u_s(p)=0$$

$$\bar{u}_{s'}(p')(m-\gamma p')=0$$

$u_s(p)$ の規格直交性により次の式が成り立つ,
これらの式を Mathematica で取り入れるために, 例えば, 最初の式を次のように書き直す。

$$(m-Gamma*P[i])**U[li[s],P[i]]=0$$

この式は, U[P[i]] を非可換な積中で見つけると, その積の項を始めから調べ,m-Gamma*P の形の式で,P は 4 次元運動量の和を表し, その和中に P[i] を含んでいる項を見つける。 その項を,U[P[i]] の直前まで交換によって移す。 その項が含む m と和 P 中の P[i] を除く。 図 1 ～図 3 はその流れ図である。 第二の式を取り入れるには, 同様にすればよいが, 積の項は最後の項から調べられる。 $u_s(p)$ と $v_s(p)$ は 4 次元不定計量ベクトル空間で規格化直交系をなすから,

$$\sum_s u_s(p)\bar{u}_s(p)=(\gamma^\mu p_\mu+m)/2m$$

$$-\sum_s v_s(p)\bar{v}_s(p)=(-\gamma^\mu p_\mu+m)/2m$$

最初の式を Mathematica のコマンドで書くと次のようになる。

$$Sum[U[li[s],P[i]]**UBAR[li[s],P[i]],\{s\}]=(Gamma*P[i]+m)/(2m)$$

図 4 は流れ図である。

文献

【1】T. Sasaki,Automatic Generation of Feynman Graphs in QED. J. Comp. Phys. 22,2,p189 ～ p214,1976
【2】坂本熏, 温度グリーン関数の自動生成について, 講究録,581,p85 ～ p100,1986
【3】中西譲, 新物理学シリーズ 19 場の量子論, 培風館,1975
【4】小池慎一,Mathematica 数式処理入門, 技術評論社,1990
【5】Wolfram,Mathematica^{TM},Addison,Wesley,1988
【6】Roman Maeder,Programming in Mathematica,Addison,Wesley,1990

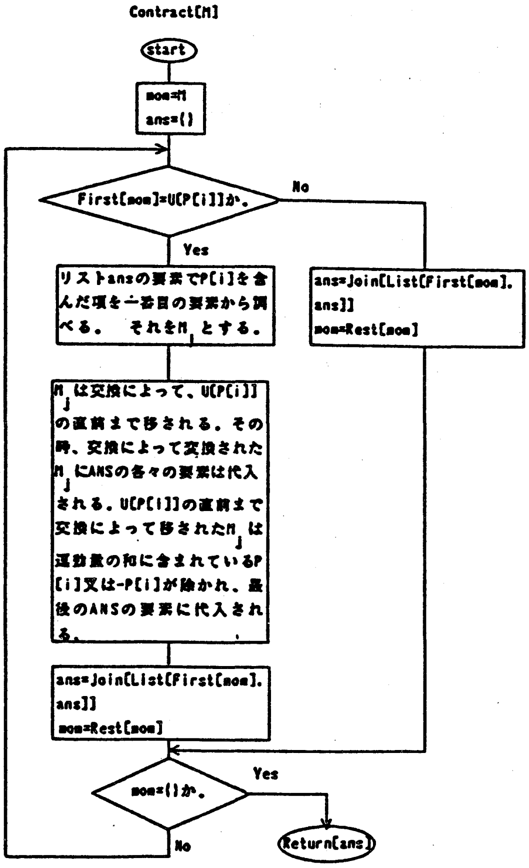

図1. 縮約

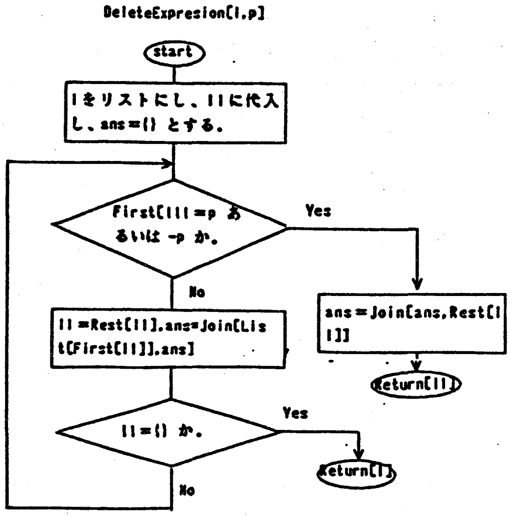

図3. 運動量 p が運動量の和に含まれているとき、それを和の中から除く関数

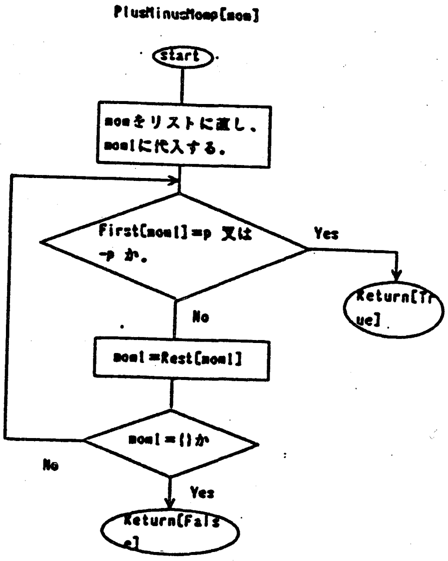

図2. 運動量 p が 運動量の和 mom に含まれているかどうか判定する関数

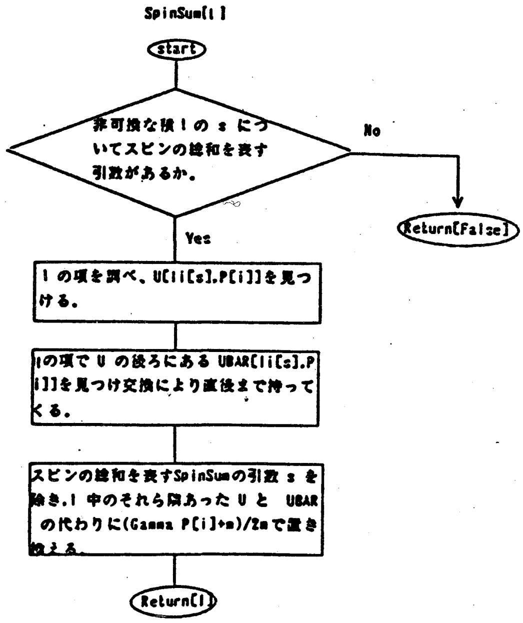

図4. U についての規格化直交条件